



TITLE:

拡散に支配された凝集過程の現象論(修士論文(1985年度))

AUTHOR(S):

安田, 敬

CITATION:

安田, 敬. 拡散に支配された凝集過程の現象論(修士論文(1985年度)). 物性研究 1986, 46(6): 797-814

ISSUE DATE:

1986-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92316>

RIGHT:

修士論文 (1985年度)

拡散に支配された凝集過程の現象論

九大・理 物理 安 田 敬

要 旨

拡散に支配された凝集過程(DLA)のクラスタ成長を記述するため, 連続体的かつ等方的な微分方程式(平均場方程式)に角度方向の相関を現象論的に導入し, 変形された平均場方程式を得た。そしてそれを評価した結果, 種々の指数間の関係式が得られた。これらの関係式は現在の計算機実験と矛盾しないが, 指数の異方性がもし有限サイズ効果ならば, [フラクタル次元] < [ユークリッド次元] は有限サイズ効果であるという可能性を示唆している。

目 次

第1章 序 論

§ 1-1 はじめに

§ 1-2 定 義

第2章 成長方程式

§ 2-1 平均場方程式

§ 2-2 平均場方程式の反省

§ 2-3 枝描像による改良

第3章 指数間の関係

§ 3-1 成長方程式の評価

§ 3-2 指 数 δ

§ 3-3 指数間の関係

§ 3-4 計算機実験との比較

第4章 次元を持った種への付着凝集

第5章 指数の異方性

§ 5-1 指数の異方性の存在

§ 5-2 有限サイズ効果が原因である場合

安田 敬

第6章 まとめ

おわりに

補 足

§ A-1 平均場方程式の評価

§ A-2 変形された平均場方程式の評価

参考文献

第1章 序 論

§ 1-1 はじめに

拡散に支配された凝集過程 (diffusion-limited aggregation : 以下, DLA と略す) は, コロイド粒子の凝集モデルとして, あるいは結晶成長において拡散過程のみを取り出した極限的モデルとして, Witten と Sander ⁽¹⁾ によって提案されたものである。このモデルはその素過程の簡単さに比べて, 非常に複雑な樹枝状のクラスタを生じることが知られている (図1参照)。



図1. 粒子数が10000であるDLAクラスタ. 文献(5)より転載

そしてその性質を定量的に扱うために, 計算機実験によって, フラクタル (ハウスドルフ) 次元をはじめとする幾つかの指数が報告されている。^{(1), (3), (5), (7)-(10)} しかし, パターンの複雑さのために理論的解析はあまり進んでおらず, 平均場の理論⁽²⁾ がフラクタル次元を予想しているにとどまっているようである。

川崎研究室では学部4年の研究課題として, 平均場方程式の一部を変えてDLAに対応するフラクタル次元が得られないかが調べられた。我々はこの着想を出発点とし, DLAのクラスタの性質をモデル的な描像でとらえることによって, 方程式の形を絞り, 指数間の関係を求めた。

§ 1-2 定 義

本論に入る前に、DLA とその指数について定義を簡単に述べておく。

計算機を用いて DLA のクラスタを作る過程は次のようなものである。まず、クラスタの種として粒子 1 個を固定し、座標の原点 (中心) とする。次に、でたらめな方向で中心から距離 r_i の点から別の粒子に酔歩運動 (random walk) させる。時間がたてばその粒子はクラスタ粒子に衝突するか、あるいは中心から遠ざかってしまうかのどちらかであろう。衝突した時は粒子の運動をその時点で止め、クラスタ構成粒子とする。中心から遠方に行った場合、いずれ帰って来る可能性はあるが、中心から r_o 以上離れた時には帰って来ないものとしてこの粒子を捨てる。このような [生成] → [酔歩運動] → [付着または離脱] という過程を反復して行なうことによって、クラスタは構成粒子を徐々に増し、やがて図 1 のように大きなものとなる。技術的な要因である生成距離 r_i と捨てる距離 r_o は

$$r_i = r_{max} + l a \quad (l \sim 5)$$

$$r_o = k r_i \quad (k \sim 2)$$

のようにとれば良いことが知られている。但し、 r_{max} はクラスタ構成粒子の中心からの距離の最大値、 a は 1 粒子の直径である。また、酔歩運動の一步は a にとるのが普通である。

こうして得られたクラスタの定量的な側面として、次のような指数の存在が知られている。

(i) フラクタル次元 D

半径 R の球内にあるクラスタ粒子数が N である時

$$N(R) \sim R^D \quad (1.1)$$

またはその微分から密度 $\rho(r)$ を求めると、クラスタの存在する空間の次元が d の時

$$\rho(r) \sim r^{D-d} \quad (1.2)$$

あるいは密度相関関数 $C(r)$ による定義も同じ指数を与える。

$$C(r) \equiv \langle \rho(\vec{r}') \rho(\vec{r}' + \vec{r}) \rangle \sim r^{D-d}$$

ここに $\langle \rangle$ は \vec{r}' についての平均を表す。指数 D が大きいほど R の増大に伴う N の増加が大きくなるので、 D は粒子のまま詰まり具合 (compactness) の目安と理解される。また、 D の代わりにその逆数 ν もしばしば用いられる。

(ii) 遮蔽長 ξ の指数 $\bar{\nu}$

$$\xi \sim N^{\bar{\nu}} \sim R^{\bar{\nu}/\nu}$$

遮蔽長とはクラスタの表面から内部に向かって拡散粒子が入ることのできる深さであり、 $\xi < R$ が DLA の重要な性質の一つである。この結果を良く表した図を図 2 に示す。

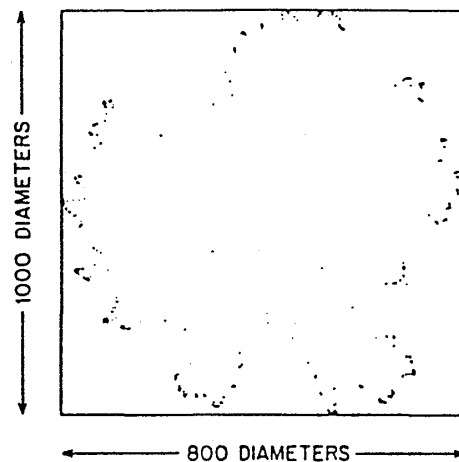


図 2. 50000 の粒子数から成るクラスタにおいて最後に付着した 1000 個のみ点で示している。付着が表面付近に限られているのがわかる。(文献 (12) より転載)

(iii) 表面粒子数 N_i の指数 δ

$$N_i \sim N^{\delta}$$

表面粒子数とは、 N 個の粒子からなるクラスタに付着過程を続けて十分に粒子が付着した後、初めの N 粒子と直接接している $N+1$ 番目以降の粒子の数である。遮蔽効果によって、後に付着する粒子ほど初めの N 個に直接付着する確率が小さくなるので、 N に対し N_i が定義できる。

第 2 章 成長方程式

§ 2-1 平均場方程式

はじめに、クラスタ成長に対する連続体近似の式として知られている、次のような微分方程式⁽³⁾について簡単に説明する。

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla^2 u - \frac{\partial \rho}{\partial t} \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} &= u [\rho + \nabla^2 \rho] \end{aligned} \quad (2.1)$$

境界条件

$$u(\infty, t) = u_{\infty} \quad (d > 2)$$

$$u(r_0, t) = u_{\infty} \quad (d = 2)$$

ここに、 $\rho(\vec{r}, t)$ は位置 \vec{r} 、時間 t におけるクラスタ構成粒子の密度（数密度または質量密度）、 $u(\vec{r}, t)$ は拡散粒子の密度である。 u_{∞} 、 r_0 は定数で、 r_0 はクラスタの大きさより大きくなければならない。第1式は反応がある場合の拡散方程式であり、酔歩運動と拡散の対応に由来する。本来なら左辺には u の時間微分が必要である。しかし、拡散支配の状態では反応に要する時間は拡散に要する時間に比べて無視できるので、流入量 ($\nabla^2 u$) を反応量 ($\partial \rho / \partial t$) に釣合わせて良い。第2式は反応の性質を記述するもので、成長はクラスタ粒子と拡散粒子の両方の密度に比例するとしている。特に第2項の $\nabla^2 \rho$ によって近傍の影響も入る。これは、計算機実験において粒子が大きさを持っているため直径だけずれた場所に新しく付着することに対応する。この項はクラスタの拡大を担っている点で重要である。

簡単のために等方近似 ($\vec{r} \rightarrow r$) をした時の (2.1) 式は平均場方程式と呼ばれている。この時、原点で滑らかであることを保証するため境界条件 $\partial u / \partial r|_{r=0} = 0$ が加わる。平均場方程式は、 ρ の初期条件として原点付近に局在したものをとると、時間が十分に経過した後は r の大きいところで $\rho(r) \sim r^{-1}$ の解を生じる。⁽⁴⁾（補足参照）これは (1.2) 式より $D = d - 1$ に対応する。 $2 \leq d \leq 6$ での計算機実験⁽⁵⁾では $D \sim 5/6 d$ なので、平均場方程式によって得られる密度分布は実際よりも粒子の詰まり方が小さい。

方程式をより実際に近づけるためには、等方近似を使わず、かつ反応に確率的揺らぎを考慮すべきことが既に指摘されている。^{(3), (6)} しかし我々は揺らぎや方向性を扱う困難を避けるために、敢て等方的で決定論的な形のままで平均場方程式の改良を試みた。そのかわり方程式の中に指数がパラメタとして入ることを許し、フラクタルであることを予め仮定した。その意味で以下の議論は現象論である。等方的で決定論的な方程式の対応物が DLA にあるとすれば、それは多くのクラスタについての平均量に対する方程式であろう。

§ 2-2 平均場方程式の反省

まず、平均場方程式の反応の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = u \{ \rho + \nabla^2 \rho \} \quad (2.2)$$

の右辺の各項の意味付けを行なう。但し、 $\rho = \rho(r, t)$ 、 $u = u(r, t)$ である。反応頻度は

拡散粒子の密度 u とその点にあるクラスタ粒子の界面の面積に比例するので、その表面積の評価が必要である。考えやすくするために ρ は離散的な正方格子上で定義された場であるとし、中心から i 格子間隔離れた点 ($r = r_i$) での ρ を ρ_i と書く。 r_i における半径方向 (記号 \parallel で表わす) を向いた界面の単位格子あたりの面積は、粒子がこの方向に良くつながっている場合

$$S_{\parallel}(r_i) \propto (\rho_{i+1} - \rho_i) + (\rho_{i-1} - \rho_i) \\ \rightarrow \nabla^2 \rho$$

第1の括弧は r_i において r_{i+1} にある粒子によってできる界面であり、第2の括弧は r_{i-1} の粒子によるものである。半径方向と垂直な方向 (以下横方向と呼び記号 \perp で表す) には粒子のつながりはほとんどなく、各粒子が同等の表面を持っている場合、横方向の表面積は

$$S_{\perp}(r_i) \propto \rho_i \rightarrow \rho$$

矢印は連続体的な場との対応を表す。(2・2)式は以上の見方に対応する式になっている。

実際のクラスタ、例えば図1を見ると粒子は枝状に集まっているので、すべての粒子が反応に同等に寄与するという平均場近似は良くない。そこで横方向について相関を考慮し、反応を再評価する必要がある。枝状の固まりに対して上と同様に表面積を見積る場合、表面はフラクタルである上、枝の中心付近の粒子は遮蔽されているので困難が予想される。次の節ではモデル的な描像によってこれらの性質を取込み、改良された平均場方程式を得る。

§2-3 枝描像による改良

粒子の横方向の集まり具合を記述するためのモデル的な描像として、原点から円錐のような枝が出ている、といったものを考える。但し枝自身にも内部構造を許して横方向の相関がフラクタル次元 D_{\perp} で記述できるものとする。この考えに従って次のような2つの量を導入する。

$L(r, t)$: 原点から距離 r の位置での枝の半径

$n(r, t)$: 半径 r の球面上での単位面積あたりの枝数

どちらも等方的な関数としているので、枝の太さのばらつきや配置の異方性はいっていない。

これらの量と ρ との関係は次のようにして求められる。一本の枝について考えると、枝の中心軸から距離 x 離れた場所での密度 ρ_{\perp} は、 D_{\perp} の定義より

$$\rho_{\perp}(x) \propto x^{D_{\perp}-d}$$

すべての枝を考慮に入れて、原点から距離 $r \sim r + \Delta r$ にある粒子数を求めると、

$$\rho(r) r^{d-1} \Delta r \propto r^{d-1} n(r) \int_0^{L(r)} dx x^{d-2} \rho_{\perp}(x) \Delta r$$

であるので、次の式を得る。

$$\rho(r) \propto n(r) [L(r)]^{D_{\perp}-1} \quad (2.3)$$

クラスタの先端付近の密度の小さな領域では枝上の固まり方が不十分で、上のような見方は有効でないと思われる。(2.3)式は凍結領域、あるいはそれに近い反応領域を記述する式と解釈すべきであろう。

前節で見積った半径方向の表面積は、それと垂直な横方向の相関によっては影響を受けないと思われるので、半径方向の反応 $(\partial \rho / \partial t)_{\parallel}$ としては(2.2)式の $u \nabla^2 \rho$ をそのまま用いることにする。一方、横方向の反応 $(\partial \rho / \partial t)_{\perp}$ は枝の側面への付着であり、半径の増加に対応するので、(2.3)式より

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)_{\perp} \propto n L^{D_{\perp}-2} \frac{\partial L}{\partial t} \propto \rho \frac{\partial L}{\partial t} / L \quad (2.4)$$

$\frac{\partial L}{\partial t}$ を求めるために、我々は次のような仮定を置いた。

〔条件1〕 枝の成長は局所的に見れば独立した小さなクラスタの成長である。

すなわち、他の枝からの影響は拡散場を減ずるのみで、成長の機構そのものには効かないと考えた。この仮定の下では、クラスタ半径 R の時間変化からの類推によって、 L の時間変化を決めることができる。

半径 R のクラスタに流れ込む全拡散流は $u_{\infty} R^{d-2}$ に比例するので、粒子数 N の変化は

$$\frac{dN}{dt} \propto u_{\infty} R^{d-2}$$

(1.1) 式より、

$$\frac{dR}{dt} \propto u_{\infty} R^{d-D-1} \quad (2.5)$$

条件1に従って(2.5)式の諸量に対し、置換え： $R \rightarrow L$, $D \rightarrow D_{\perp}$, $u_{\infty} \rightarrow u(r, t)$ を行なうことによって、次の式が得られる。

$$\frac{\partial L}{\partial t} \propto u L^{d-D_{\perp}-1} \quad (2.6)$$

以上の結果より、反応の方程式は次のように書ける。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = u [r^{\beta(d-D_{\perp}-2)} \rho + \nabla^2 \rho] \quad (2.7)$$

ここで枝の半径の指数 β を導入した。これは凍結した領域において $L(r) \sim r^{\beta}$ のように定義される。また、比例定数は、時間・空間のスケールを変える意味しか持たないので省略した。

第3章 指数間の関係

§ 3-1 成長方程式の評価

方程式 (2.7) を評価することによって2つの関係式が得られる。補足 A-2 に示すように反応の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = u r^p [\rho + r^q \nabla^2 \rho] \quad (3.1)$$

が導く ν と $\bar{\nu}$ は p, q と次のような関係にある。

$$\left. \begin{aligned} p &= (d\nu - 2\bar{\nu} - 1) / \nu \\ q &= (4\bar{\nu} - 2\nu) / \nu \end{aligned} \right\} \quad (3.2)$$

但し上式は $\bar{\nu} < \nu$ を前提として成立つものである (補足 A-2 参照)。(2.7) 式と (3.1) 式を比較して p, q を (2.7) 式のパラメタで表し、それを (3.2) 式に代入すれば次式が得られる。

$$\frac{\bar{\nu}}{\nu} = 1 - \frac{d - D_{\parallel}}{2} \quad (3.3)$$

$$2(d - D_{\parallel} - 1) = \beta(d - D_{\perp} - 2) \quad (3.4)$$

(3.3) 式は $D_{\parallel} < d$ である限り、 $\bar{\nu} < \nu$ を導くので、(3.1) 式の制限内に入っている。

§ 3-2 指数 δ

指数 δ を他の指数で表すことを考える。簡単な評価の方法では、反応領域にある粒子数が表面粒子数 N_i と同程度だとして⁽⁷⁾

$$N_i \sim \frac{\xi}{R} N \sim N^{1+\bar{\nu}-\nu}$$

すなわち、 $\delta = 1 + \bar{\nu} - \nu$ が得られるが、表面以外の粒子まで N_i に入れているので、見積り過ぎであろう。この値は、むしろ上限と見なすべきである。⁽⁸⁾

我々は N_i として反応領域にある表面積を用いた。粗く見積ると、遮蔽長が ξ の時、枝（半径 L ）一本あたり ξL^{d-2} の面積が反応に有効であるが、枝にもフラクタルな性質があり、小さなスケールではもっと大きな表面積が見えて来るはずである。この困難を避けるために δ に対しても D の場合と同様に δ_{\parallel} , δ_{\perp} の 2 つを導入する。この 2 つを使って N_i は次のように書ける。

$$N_i \sim N^{\delta_{\parallel}} \sim R^{D_{\parallel} \delta_{\parallel}} \sim \left(\frac{L^{D_{\perp} \delta_{\perp}}}{L^{d-1}} \right) (L^{d-2} \xi) (n R^{d-1})$$

下段の右辺第 1 括弧は枝の単位側面積あたりの反応可能な面積、第 2 括弧は枝の有効な側面積、第 3 括弧は枝の総数である。上の関係と (3.3) 式により

$$D_{\parallel} \delta_{\parallel} = \beta D_{\perp} (\delta_{\perp} - 1) + \frac{3 D_{\parallel} - d}{2} \quad (3.5)$$

枝上の反応可能な表面積としてクラスタ全体での値 $R^{D_{\parallel} \delta_{\parallel}}$ と同じ形の $L^{D_{\perp} \delta_{\perp}}$ を用いた。すなわち、条件 1 を再び使っている。

§ 3-3 指数間の関係

我々はクラスタの内部構造として指数 D_{\perp} , δ_{\perp} を持つ枝を導入し、 \parallel 方向の指数と \perp 方向の指数を関係づける式を得た。しかし枝描像とともに新たな指数 β が入って来たので未だ不十分である。そこで、指数 β を消去するために次のような条件を設定する。

〔条件 2〕 反応領域の長さのスケールは一つである。

具体的には次の条件で表現できる。

(i) 枝の半径 L と枝間距離 l は同程度である。

(ii) 遮蔽長 ξ と l は同程度である。

既に得られている (3.3), (3.4) 式の下では上の 2 つは等価で、片方は他を導く。

拡散場はラプラス方程式に従うので、3 次元以上では枝の存在による拡散場の遮蔽はおおよそ L の距離まで及ぶ。そのため、枝と枝の距離が L よりも十分大きい時には拡散粒子は枝と枝の間隙を通過してクラスタの内部まで浸透でき、 L の増加は続く。よって、ある場所において反応が終るのは L が l と同じ程度になった時であると予想される。これが条件 (i) である。また、条件 (ii) は、ラプラス方程式の解の性質として拡散場は境界で 0 と定められた幅 l のすき間において、距離 l 程度で減衰してしまうことから来ている。

条件 (i) または (ii) と (3.3), (3.4) 式から、 D_{\perp} , δ_{\perp} および β は d と D_{\parallel} を用いて次の

ように書ける。

$$D_{\perp} = \frac{d^2 - d D_{\parallel} - 2 D_{\parallel}}{d - D_{\parallel} - 2} \quad (3.6)$$

$$\frac{\bar{\nu}}{\nu} = \beta = 1 - \frac{d - D_{\parallel}}{2} \quad (3.7)$$

さらに、(3.5)式に上の結果を代入して

$$D_{\parallel} \delta_{\parallel} = D_{\perp} \delta_{\perp} + \frac{d - D_{\parallel}}{2} (d - 1 - D_{\perp} \delta_{\perp}) \quad (3.8)$$

指数 δ に対して知られている経験則⁽⁷⁾ $D \delta = d - 1$ は上式の可能な解になっている。

§ 3-4 計算機実験との比較

我々が得たのは指数間の関係のみだが、 D_{\parallel} として計算機実験の値を採用すれば、他の指数が得られるので、数値的な比較が可能である。その結果を表1に示す。

		D_{\parallel}	$\bar{\nu}$	D_{\perp}	β
計算機実験	d=2	1.69 ± 0.02	0.48 ± 0.01	1.59 ± 0.04	~ 1
	d=3	2.51 ± 0.06	0.32 ± 0.05	—	—
理 論	d=2	—	1/2	1.63 ± 0.03	0.85 ± 0.01
	d=3	—	0.30 ± 0.01	2.4 ± 1	0.76 ± 0.03

表1. 計算機実験と理論の比較. (計算機実験の各数値は、 D_{\parallel} は文献(5)、 $\bar{\nu}$ は(8)、 D_{\perp} と β は(10)より引用)

遮蔽長さの指数 $\bar{\nu}$ とクラスタ半径 R の指数 ν との関係は、現在確立されていない問題の一つである。Rácz と Plischke⁽⁸⁾ は計算機実験で $\bar{\nu} < \nu$ のデータを提出したが、Meakin と Sander⁽⁹⁾ は2次元の場合 R の増大とともに $\bar{\nu}$ が少しずつ増えていくことに着目し、 $R \rightarrow \infty$ で $\bar{\nu} \rightarrow \nu$ であると主張した。これに対し Rácz 等は、 $\bar{\nu}$ の増大は2次元特有の技術的な原因によるもの(粒子を捨てる半径が小さい等)かもしれないと指摘している。⁽⁹⁾ また、表式

$$D = (d^2 + 1) / (d + 1)$$

を導いた平均場的な理論⁽²⁾ は $\bar{\nu} < \nu$ を仮定している。我々の議論は(3.1)式の制約によって $\bar{\nu} < \nu$ でのみ意味を持つが、その数値は表1のように Rácz 等のデータと良く合っている。

さらに高次元($d > 3$)での比較が必要であろう。

D_{\perp} については、誤差が大きいので正確な比較はできないが、少なくとも $D_{\perp} < D_{\parallel}$ である

ことは一致している。 D_{\perp} についても高次元($d > 2$)のデータとの比較が望まれる。

計算機実験で D_{\perp} がどのように決められるか、また、枝描像の量 β を実際どのような量に対応させたかについて少し触れておく。

Meakin と Vicsek⁽¹⁰⁾ は、中心からの距離 R を固定し角度を変数とした密度相関関数 $C_R(\theta)$ を調べた。 C_R によって D_{\perp} は定義され、

$$C_R(\theta) = \langle \rho_R(\theta' + \theta) \rho_R(\theta') \rangle \sim \theta^{D_{\perp} - d}$$

である。ここで、 $\langle \rangle$ は θ' について角度方向の平均をとることを表す。その結果、彼らは図3の曲線を得た。直線的な部分はべき的な相関の存在を意味し、その傾きから D_{\perp} が決まる。また、 R

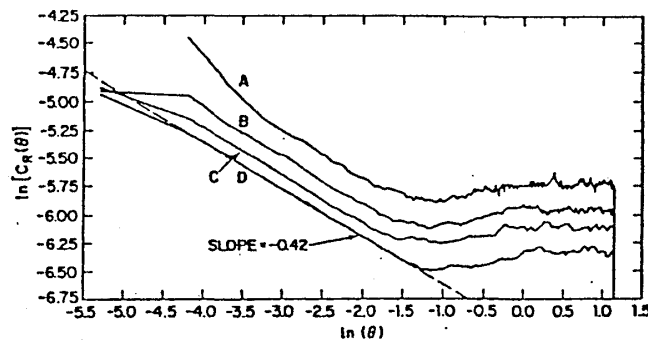


図3. $\ln \theta$ と $\ln C_R(\theta)$ の関係. 各曲線は異なる R についてのデータで、A, B, C, Dの順に $R = 75, 150, 225, 300$ である。(文献(10)より転載)

によらず曲線は極小を持ち、その角度はほぼ一定のように見える。この極小点より角度が大きくなると相関は弱まり、 C_R は一定値に近づいている。このことから、横方向のつながりが切れる角度の存在が予想されるので、この幅を枝描像の L と対応させることができる。この角度が $\Delta \theta$ の時、 $R \Delta \theta$ は枝の直径に対応するはずであるから

$$2L = R \Delta \theta$$

2次元で、 $75 \leq R \leq 300$ における $\Delta \theta$ は、図3より $e^{-1.2} \sim 0.3$ なので、この領域での枝の半径はクラスタ半径の $1/7$ 程度になる。

表1で $\beta \sim 1$ としたのは、 $\Delta \theta$ の R 依存性が図3からは見出されないからである。さらに詳しく決めるには、非常に多くのサンプルを取って極小点が正確に定義できるようにし、その角度の R 依存性を調べねばならない。我々の理論のように $\beta < 1$ ならば、 $\Delta \theta$ は R の増大とともに減少していくはずである。

第4章 次元を持った種への付着凝集

種（初期クラスタ）が d_s 次元の場合について少し触れておく。

図4（ $d=2, d_s=1$ ）のように $d_s \neq 0$ の場合でも、種と垂直な方向を \parallel 方向、それに垂直な方向を \perp 方向と定めれば、遮蔽長 ξ 、枝の半径 L 、枝間距離 l は $d_s=0$ の場合と同様に定義できる。クラスタ外部の拡散場の漸近解は d_s に依存するが、実際に d_s を含めて2章の議論をやり直すと、反応の式(2・7)はそのまま量用することがわかる。よって3章の指数間の関係は d_s の影響を受けない。

Meakin の計算機実験⁽¹¹⁾ によって D_{\parallel} の数値は得られている。それを表2に示す。但し指数の定義は次のようなものである。

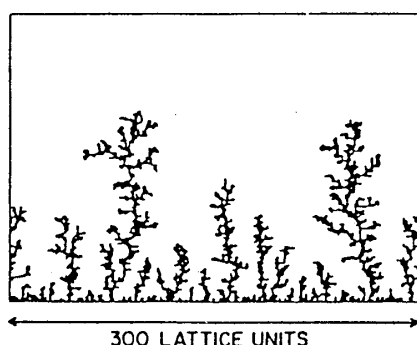


図4. $d=2, d_s=1$ の場合の凝集体.
(文献(11)より転載)

		ϵ	D_{\parallel}
$d=2$	$d_s=1$	1.30 ± 0.08	1.77 ± 0.05
$d=3$	$d_s=1$	0.67 ± 0.03	2.50 ± 0.07
	$d_s=2$	1.7 ± 0.2	2.59 ± 0.07

表2. 種が次元を持っている場合の
指数. (文献(11)より引用)

クラスタ粒子が種から \parallel 方向の距離 r 以内に、種の単位大きさあたり N 個ある時、指数 ϵ は

$$r \propto [N(r)]^{\epsilon}$$

と定義される。これを用いて種から距離 r の場所での平均密度を求めると、

$$\rho(r) \propto [r^{d-d_s-1}]^{-1} \frac{dN}{dr} \propto r^{(1/\epsilon)-d+d_s}$$

これを D_{\parallel} の ρ による定義式(1・2)と比べることにより、

$$D_{\parallel} = \frac{1}{\epsilon} + d_s$$

現在までのところ、 $d_s \neq 0$ の場合について、 D_{\perp} や $\bar{\nu}$ を調べた計算機実験は無いようである。これらについて、表1のような比較ができれば、我々の得た指数の関係式の検証になるだろう。

第5章 指数の異方性

§5-1 指数の異方性の存在

我々は内部構造として D_{\perp} で特徴づけられる枝を持つクラスタはどのような D_{\parallel} を持つか、という立場で議論を進め、それらの関係を得ることができた。次の問題は、この区別がDLAにおいて本質的なものかどうか、である。§3-4で示したように計算機実験⁽¹⁰⁾では明らかに $D_{\parallel} > D_{\perp}$ である。しかしこれが有限サイズ効果であり、 D_{\parallel} , D_{\perp} を決めるクラスタの大きさを大きくすればその差が縮まっていく可能性もある。

Meakin 等⁽¹⁰⁾は、図5のように、半径がある大きさ以上になると D_{\perp} は D_{\parallel} と異なったままではほぼ一定になることを示した。それ故、彼らは D_{\parallel} と D_{\perp} の相異は有限サイズ効果ではない

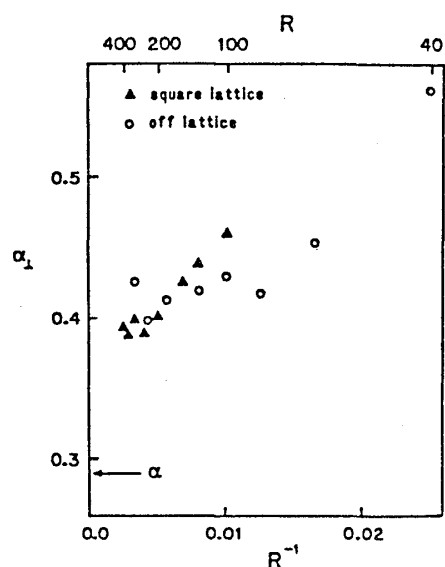


図5. $\alpha_1 = d - D_{\perp}$ と R の関係。粒子が正方格子に限られている場合と、そうでない場合のデータが示されている。矢印は、 $\alpha_{\parallel} = d - D_{\parallel}$ の値である。(文献(10)より転載)

と予想している。しかし図5の左端から幾つかのデータは慣性半径付近のものであり、反応領域に入っている可能性があるため、枝が R に見合った大きさになっていないおそれがある。有限サイズ効果について結論を出すには、さらに大きなクラスタを得る必要があるだろう。

§5-2 有限サイズ効果が原因である場合

この節では一貫して D_{\parallel} と D_{\perp} の相異は方向の違いからではなく、 L と R という大きさの違いから来る有限サイズ効果であると仮定する。そして、指数 D とそれを決めるスケールとの関係^(註)

(注) 有限のスケールでの指数 $D(R)$ は、例えば密度相関関数 $C(r)$ を用いて、次のように定義される。

$$D(R) = \frac{d(\ln C(r))}{d(\ln r)} \Big|_{r=R} + d$$

を調べ、仮定の可能性について考察する。

まず、図6-aのようにクラスタをその半径程度の長さで粗視化して基本単位とする。これがDLA過程によって成長すると、やがてb図のように基本クラスタと同じ程度の大きさの枝を持った大きなものになるであろう。上の仮定に従えば、b図の枝の指数 $D_{\perp}^{(b)}$ は基本クラス

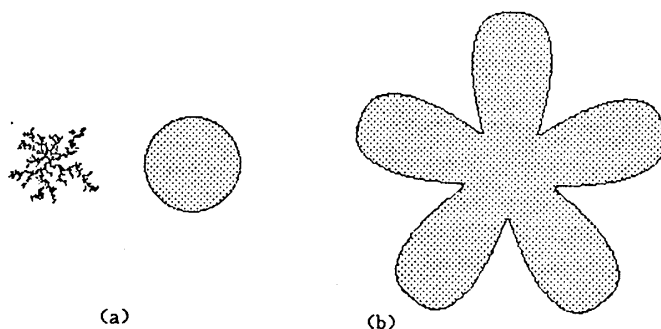


図6. (a) クラスタの粗視化.
(b) (a)のクラスタがある程度成長したものを (a)と同じ粗視化の程度で見た場合.

タの指数 $D_{\parallel}^{(a)}$ と等しいはずである。そこで、もし枝の指数 D_{\perp} と全体の指数 D_{\parallel} との関係が d をパラメタとする関数 f_d によって、 $D_{\parallel} = f_d(D_{\perp})$ のように書けているならば、b図のクラスタの場合

$$D_{\parallel}^{(b)} = f_d(D_{\perp}^{(b)}) = f_d(D_{\parallel}^{(a)}) \quad (5.1)$$

b図のクラスタをその半径で粗視化すれば、それを新たな基本クラスタとして上と同じ議論が可能である。よって、関数 f_d さえわかれば、上の操作を繰返し行なうことにより R の変化に伴う D_{\parallel} の変化を見ることができる。

粗視化の段階を n で表すと、その時の基本クラスタに対応する D_{\parallel} , R および L は

$$D_n = f_d(D_{n-1})$$

$$R_n = c_n L_n^{1/\beta_n}$$

$$L_n = R_{n-1}$$

但し c_n は比例定数である。真のフラクタル次元、すなわち無限クラスタの D_{\parallel} は (5.1) 式の固定点 D^* として定義され、 d の関数になるはずである。

我々は関数 f_d として既に (3.6) 式を得ている。すなわち

$$D_n = D_{n-1} + \frac{(d - D_{n-1})^2}{d - D_{n-1} + 2} \quad (5.2)$$

これを用いて計算機実験と比較する。計算機実験では $d = 2$ の場合のみ D の R 依存性が表 3 のように調べられている。表 3 の、 $5 \leq R \leq 50$, $D = 1.68$ のデータを n 段階のものと見ると

No.	1	2	3
$D(R)$	1.62 ($2 \leq R \leq 8$)	1.68 ($5 \leq R \leq 50$)	1.71 ($50 \leq R \leq 100$)

表 3. 有限サイズ効果についての計算機実験の結果.
(No. 1, 3 のデータは文献(10), No. 2は(5)より引用)

$n-1$ 段階, $n+1$ 段階のデータは上の議論から予想できて,

$$D_{n-1} = 1.62 \quad (1 < R_{n-1} < 7)$$

$$D_{n+1} = 1.72 \quad (35 < R_{n+1} < 350)$$

但し, § 3-4 で求めた値: $R_n / L_n = R_n / R_{n-1} \sim 7$ を R を見積るために使った。上の値は表 3 のデータと合っているように見える。しかし, 粗視化の操作を続けていくにつれて D の値は (5.2) 式の固定点 $D^* = d$ に漸近する。すなわち上の議論は DLA のクラスタはフラクタルでないという結論を含んでいる。この真偽を調べるには, $D_{n+1} = 1.71$ を与えるクラスタの 7 倍程度の大きさ ($350 < R < 700$) のクラスタが, $D_{\parallel} = D_{n+2} = 1.75$ を示すかどうかを計算機実験で調べるのが直接的であろう。現在までのところこのような大きなクラスタは得られていないようである。

第 6 章 ま と め

我々は平均場方程式に横方向の相関を考慮し, 指数間の関係を導いた。そして, これらは現在得られている数値データと矛盾しないように見える。しかし指数の異方性を採用したため, それが有限サイズ効果か否かという問題が重要になって来た。この真偽によって多くの可能性が考えられる。

もし異方性が有限サイズ効果ならば, D_{\parallel} と D_{\perp} を結ぶ関数の固定点として, フラクタル次元を決めることができる。そこで我々の関係式を用いると $D = d$ となり, 計算機実験の結果 ($D < d$) は有限サイズ効果として理解されるべきものとなる。あるいは, モデルに依存した我々の関係式の代わりに厳密な表式があって, それが $D < d$ となる固定点を持つかもしれない。

逆に異方性が無限サイズの場合にも残るのならば, DLA のクラスタは, 初期条件として原

安田 敬

点に1粒子を置いたという情報を無限に長いスケールまで残すことになる。

これらの問題を整理し、DLAをさらに理解するためには、クラスタの成長の性質や内部の構造を特徴づける指数($\bar{\nu}$, D_{\perp} 等)について深く調べることが今後の課題として必要であろう。

おわりに

二年間、多面にわたって御指導いただき、公私ともにお世話になった川崎恭治先生、太田隆夫先生、関本謙先生、その他の固体理論研究室の皆様に深く感謝します。

補 足

§ A-1 平均場方程式の評価

等方近似の下での(2・1)式の評価の方法をBall等⁽⁴⁾の考え方をを用いて簡単に説明する。

遮蔽効果が存在し、 ρ が局在関数であるので、領域を次のように3つに分けて考えることができる。

〔領域Ⅰ〕 遮蔽効果によって ρ が凍結した領域($0 < r < R$)である。

〔領域Ⅱ〕 反応が活発な領域($R < r < R + \xi$)である。この領域の解は近似的に、スケーリング解：

$$\rho(r, t) \sim \frac{1}{\xi^2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{r-R}{\xi} \right)^2 \right\}$$

$$u(r, t) \sim \frac{\dot{R}}{\xi} \frac{r-R}{\xi}$$

で表せる。時間依存性は R と ξ にのみ入っている。

〔領域Ⅲ〕 ρ が小さいため反応が無視できる領域($r \gg R$)である。この領域では近似的に u はラプラス方程式に従い、反応の式では $u \rightarrow u_{\infty} \equiv 1$ とできるので

$$\rho(r, t) \sim \exp \left[t - \frac{r^2}{4t} \right]$$

$$u(r, t) \sim \begin{cases} 1 - \left(\frac{R}{r} \right)^{d-2} & (d > 2) \\ (\ln \frac{r}{R}) / (\ln \frac{r_0}{R}) & (d = 2) \end{cases}$$

各領域の解が全体の解の一部であるためには、領域間の境目で解は同じオーダーでなければならない。この次元解析により以下の結果が得られる。

$$\rho(r) \sim r^{-1}$$

$$R(t) \sim t$$

$$\xi(R) \sim [\rho(R)]^{-1/2} \sim R^{1/2}$$

§ A-2 変形された平均場方程式の評価

$u(r, t)$, $\rho(r, t)$ に対する次の方程式において、パラメタ p , q と ν , $\bar{\nu}$ との関係を求める方法を略述する。

$$\left. \begin{aligned} 0 &= \nabla^2 u - \frac{\partial \rho}{\partial t} \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} &= u r^p [\rho + r^q \nabla^2 \rho] \end{aligned} \right\} \quad (\text{A} \cdot 1)$$

前節と同じ方法が可能だが、 r^p , r^q の因子のために若干の補正が必要である。領域Ⅱでは $\bar{\nu} < \nu$ に限って前節と類似の次のようなスケーリング解を持つ。

$$\left. \begin{aligned} \rho(r, t) &\sim \frac{1}{R^p} \frac{1}{\xi^2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{r-R}{\xi} \right)^2 \right\} \\ u(r, t) &\sim \frac{1}{R^p} \frac{\dot{R}}{\xi} \frac{r-R}{\xi} \end{aligned} \right\} \quad (\text{A} \cdot 2)$$

領域Ⅲにおいては、 ρ に対する方程式：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = r^p [\rho + r^q \nabla^2 \rho]$$

を直接解くのは困難である。しかし領域Ⅱとの整合条件のみ必要なので、 R 付近での解がわかれば十分である。よって r^p を R^p に置換えて良い。そして変数変換：

$$\frac{dt'}{dt} = [R(t)]^p$$

$$r' = r^{(2-q)/2}$$

により、因子 R^p , r^q を消去することができる。結局、領域Ⅲの解として次の式を得る。

$$\rho(r, t(t')) \sim \exp \left[t' - \frac{1}{t'} \frac{r^{2-q}}{(2-q)^2} \right]$$

以上の各領域の解に対し、前節と同様に整合条件を課すことによって、次の関係が得られる。

$$\rho(r) \sim r^{-(2p+q+2)/2}$$

$$R(t) \sim t^{2/(2-q-2p)}$$

$$\xi(R) \sim [R^p \rho(R)]^{-1/2} \sim R^{(q+2)/4}$$

領域Ⅱでは、 ρ は (A・2) 式のようにガウス関数で近似できる。このため R 付近では $\nabla^2 \rho < 0$ となり、 $\partial \rho / \partial t$ の中に負の成長が含まれることになる。しかし (A・1) の第2式において正の項 ρ との比を調べると、 $q < 2$ である限り $(r^q \nabla^2 \rho) / \rho \sim R^{q-2} \ll 1$ (R 大) なので、この効果は無視できる。逆に $q = 2$ ，すなわち $\bar{\nu} = \nu$ の場合、負の成長は無視できなくなり、(A・1) 式でクラスタ成長を記述することは不可能となる。

参考文献

- (1) T. A. Witten and L. M. Sander, Phys. Rev. Lett. **47** (1981) 1400.
- (2) M. Muthukumar, Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 839.
M. Tokuyama and K. Kawasaki, Phys. Lett. A **100** (1984) 337.
H. Hentschel, Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 212.
- (3) T. A. Witten and L. M. Sander, Phys. Rev. B **27** (1983) 5686.
- (4) M. Nauenberg, Phys. Rev. B **28** (1983) 449.
R. Ball, M. Nauenberg and T. A. Witten, Phys. Rev. A **29** (1984) 2017.
- (5) P. Meakin, Phys. Rev. A **27** (1983) 604.
P. Meakin, *ibid.* **27** (1983) 1495.
- (6) Y. Kantor, T. A. Witten and R. Ball, preprint.
- (7) P. Meakin and T. A. Witten, Phys. Rev. A **28** (1983) 2985.
- (8) Z. Rácz and M. Plischke, Phys. Rev. A **31** (1985) 985.
- (9) P. Meakin and L. M. Sander, Phys. Rev. Lett. **54** (1985) 2053.
M. Plischke and Z. Rácz, *ibid.* **54** (1985) 2054.
- (10) P. Meakin and T. Vicsek, Phys. Rev. A **32** (1985) 685.
- (11) P. Meakin, Phys. Rev. A **27** (1983) 2616.
- (12) P. Meakin, Phys. Rev. A **32** (1985) 453.